11. Méthode des moindres carrés et procédé de Gram-Schmidt

MTH1008

Sébastien Le Digabel
Polytechnique Montréal

H2024

2023-12-18

v1

Liens avec le livre et exercices suggérés

6.4	Procédé de Gram-Schmidt	1, 3, 5, 7, 9, 11, 13, 15, 17, 19, 21, 23, 25
6.5	Méthodes des moindres carrés	1, 3, 5, 7, 9, 11, 13, 15, 17, 19, 21, 21, 24, 25

Approximations par moindres carrés

Procédé de Gram-Schmidt

Décomposition QR

Introduction

- $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ avec $m > n$ et $r(\mathbf{A}) = n$
- Le SÉL $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ est de plein rang colonne et ne possède pas toujours de solution
- Au lieu on résout le système $\mathbf{A}^\top \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{A}^\top \mathbf{b}$ qui possède toujours une solution (ce sont les *équations normales*)
- $\mathbf{p} = \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}$ est la projection de $\mathbf{b}$ dans $\mathrm{Im}(\mathbf{A})$: C'est donc le point de $\mathrm{Im}(\mathbf{A})$ le plus proche de $\mathbf{b}$
- $\hat{\mathbf{x}}$ minimise l'erreur

$$\|\mathbf{e}\|^2 = \|\mathbf{b} - \mathbf{p}\|^2 = \|\mathbf{b} - P\mathbf{b}\|^2 = \|\mathbf{b} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}\|^2$$

- On peut donc voir $\hat{\mathbf{x}}$ comme la *meilleure "solution" possible* à $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$
- $\hat{\mathbf{x}}$ est appelée la solution de $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ au sens des *moindres carrés*

Application : Droite d'ajustement (1/3)

- Étant donnés $m > 2$ *points de données* $(t_1, b_1), (t_2, b_2), \ldots, (t_m, b_m)$ de $\mathbb{R}^2$, on essaie de trouver l'équation d'une droite qui passe par les m points
- Cette équation est $b(t) = c + dt$ avec $c, d \in \mathbb{R}$
- c et d devraient être les solutions du système $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ avec

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & t_1 \\ 1 & t_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & t_m \end{bmatrix}, \ \mathbf{x} = \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix}, \ \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}$$

Droite d'ajustement (2/3)

- Or le système $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ n'a a priori pas de solution car il est peu probable que les m points soient alignés
- Au lieu, on résout
$$\mathbf{A}^\top \mathbf{A}\,\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{A}^\top \mathbf{b}$$
- La solution $\hat{\mathbf{x}} = (c, d)$ donnera la *droite d'ajustement* ou de *régression* qui minimise la somme des erreurs verticales avec les points de données : $\hat{\mathbf{x}}$ est tel que $E(\mathbf{x}) = \|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2$ est le plus petit possible :
$$\|\mathbf{e}\|^2 = E(\hat{\mathbf{x}}) = \min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^2} E(\mathbf{x})$$

Droite d'ajustement (3/3)

Explicitement, le système d'équations 2×2 qui définit la droite d'ajustement est

$$\underbrace{\begin{bmatrix} m & \displaystyle\sum_{i=1}^{m} t_i \\ \displaystyle\sum_{i=1}^{m} t_i & \displaystyle\sum_{i=1}^{m} t_i^2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}^\top \mathbf{A}} \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \displaystyle\sum_{i=1}^{m} b_i \\ \displaystyle\sum_{i=1}^{m} t_i b_i \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}^\top \mathbf{b}}$$

Point de vue géométrique

- On cherche le vecteur de $\mathrm{Im}(\mathbf{A})$ qui est le plus proche de $\mathbf{b}$
- Il s'agit du vecteur $\mathbf{p}$ qui minimise (le carré de) la distance

$$\|\mathbf{e}\|^2 = \|\mathbf{p} - \mathbf{b}\|^2$$

- Cette distance représente la somme des carrés des erreurs verticales entre les points et la droite

Point de vue algébrique

- Chaque vecteur $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ se décompose en $\mathbf{b} = \mathbf{p} + \mathbf{e}$ où $\mathbf{p} \in \mathrm{Im}(\mathbf{A})$ et $\mathbf{e} \in \mathrm{Im}(\mathbf{A})^\perp = \mathrm{Ker}(\mathbf{A}^\top)$
- Le système $\mathbf{A}\,\mathbf{x} = \mathbf{p} + \mathbf{e}$ n'a pas de solution mais $\mathbf{A}\,\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{p}$ possède une solution
- $\mathbf{A}\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$ et $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^m$ sont dans $\mathrm{Im}(\mathbf{A})$, donc $\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{p} \in \mathrm{Im}(\mathbf{A})$. Ainsi $(A\mathbf{x} - \mathbf{p}) \perp \mathbf{e}$
- Cette solution minimise l'erreur

$$E(\mathbf{x}) = \|\mathbf{A}\,\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2 = \|\mathbf{A}\,\mathbf{x} - \mathbf{p}\|^2 + \|\mathbf{e}\|^2$$

et

$$E(\hat{\mathbf{x}}) = \|\mathbf{A}\,\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b}\|^2 = \|\mathbf{e}\|^2$$

Point de vue de l'optimisation

- On minimise la fonction d'erreur

$$E(\mathbf{x}) = \|\mathbf{A}\,\mathbf{x} - \mathbf{b}\|^2$$

- Pour cela, on résout $\nabla E(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ (donne $\hat{\mathbf{x}}$) et on montre que $\nabla^2 E(\hat{\mathbf{x}})$ est *définie-positive*

- Ce qui revient à

$$\mathbf{A}^\top \mathbf{A}\,\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{A}^\top \mathbf{b}$$

Solution analytique

- Il n'est pas nécessaire de résoudre explicitement $\mathbf{A}^\top \mathbf{A}\,\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{A}^\top \mathbf{b}$, car on peut trouver une solution analytique

- Par exemple, par l'optimisation, on obtient

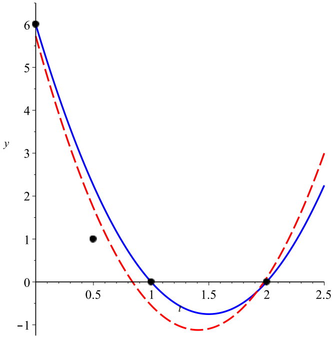
$$\begin{cases} d = \dfrac{\sum_{i=1}^m t_i b_i - m\,\hat{t}\,\hat{b}}{\sum_{i=1}^m t_i^2 - m\hat{t}^2} = \frac{\sum_{i=1}^m (t_i - \hat{t})(b_i - \hat{b})}{\sum_{i=1}^m (t_i - \hat{t})^2} \\ c = \hat{b} - d\hat{t} \end{cases}$$

avec $\hat{b} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^m b_i$ et $\hat{t} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^m t_i$ (*moyennes* des b_i et des t_i)

Généralisation

Le même principe s'applique à l'ajustement d'une courbe de forme connue à un ensemble de points donnés

Par exemple : Ajuster une parabole sur les points $(0,6),(1,0),(2,0)$ et $(1/2,1)$:



Exercice 1

Ajuster une droite aux points $(t, b) = (-1, 5), (1, 13), (2, 17)$.
Calculer l'erreur de la régression et conclure

Exercice 2

Ajuster une surface aux points
$(x, y, z) = (1, 0, 0), (0, 1, 1), (-1, 0, 3), (0, -1, 4)$

Approximations par moindres carrés

Procédé de Gram-Schmidt

Décomposition QR

Procédé de Gram-Schmidt (1/2)

Soit $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \ldots, \mathbf{u}_n$ des vecteurs linéairement indépendants de $\mathbb{R}^m$ et W le sous-espace engendré par ces vecteurs $(n \leq m)$.
La procédure suivante produit une base orthonormale de W :

(1) $\mathbf{v}_1 = \mathbf{u}_1$

(2) $\mathbf{v}_2 = \mathbf{u}_2 - \dfrac{\mathbf{v}_1^\top \mathbf{u}_2}{\mathbf{v}_1^\top \mathbf{v}_1} \mathbf{v}_1$ ($\mathbf{v}_2 \perp \mathbf{v}_1$ car obtenu par $\mathbf{u}_2 - \mathbf{p}$ avec $\mathbf{p}$ la projection de $\mathbf{u}_2$ sur $\mathbf{v}_1$)

(3) $\mathbf{v}_3 = \mathbf{u}_3 - \dfrac{\mathbf{v}_1^\top \mathbf{u}_3}{\mathbf{v}_1^\top \mathbf{v}_1} \mathbf{v}_1 - \dfrac{\mathbf{v}_2^\top \mathbf{u}_3}{\mathbf{v}_2^\top \mathbf{v}_2} \mathbf{v}_2$

⋮

Procédé de Gram-Schmidt (2/2)

$$\text{(j)}\quad \mathbf{v}_j = \mathbf{u}_j - \sum_{k=1}^{j-1} \frac{\mathbf{v}_k^\top \mathbf{u}_j}{\mathbf{v}_k^\top \mathbf{v}_k} \mathbf{v}_k$$

$$\vdots$$

$$\text{(n)}\quad \mathbf{v}_n = \mathbf{u}_n - \sum_{k=1}^{n-1} \frac{\mathbf{v}_k^\top \mathbf{u}_n}{\mathbf{v}_k^\top \mathbf{v}_k} \mathbf{v}_k$$

$$(\mathbf{n}+\mathbf{1})\quad \mathbf{q}_j = \frac{\mathbf{v}_j}{||\mathbf{v}_j||} \text{ pour tout } j \in \{1, 2, \ldots, n\}$$

Les vecteurs $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \ldots, \mathbf{q}_n$ forment la matrice $\mathbf{Q}$ et la base orthonormale recherchée. On a donc $W = \mathrm{Im}(\mathbf{Q}) = \mathrm{Im}(\mathbf{A})$ si $\mathbf{A} = [\mathbf{u}_1\ \mathbf{u}_2\ \cdots\ \mathbf{u}_n]$

Procédé de Gram-Schmidt : Remarques

- Les “nouveaux” $\mathbf{q}_i$ sont orthogonaux aux “vieux” $\mathbf{u}_j$ (avec $i > j$) :
  - $\mathbf{q}_2 \perp \mathbf{u}_1$
  - $\mathbf{q}_3 \perp \mathbf{u}_1$
  - $\mathbf{q}_3 \perp \mathbf{u}_2$
  - $\ldots$
- Si $m = n$, on obtient une base orthonormale de $\mathbb{R}^n$
- Le coût du procédé est en $\mathcal{O}(mn^2)$
- La transformation de Householder permet aussi d’obtenir une base orthornormale, à moindre coût
- La forme matricielle du procédé de Gram-Schmidt est la décomposition QR

Approximations par moindres carrés

Procédé de Gram-Schmidt

Décomposition QR

Factorisation QR (1/2)

- Si $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 & \mathbf{u}_2 & \cdots & \mathbf{u}_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ et $\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \cdots & \mathbf{q}_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ est obtenue par le procédé de Gram-Schmidt alors les $\mathbf{u}_i$ sont des combinaisons linéaires des $\mathbf{q}_i$ (et vice versa), de sorte que

$$\mathbf{A} = \mathbf{QR} \text{ avec } \mathbf{R} \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

- $\mathbf{R}$ est triangulaire supérieure et peut s'obtenir par $\mathbf{R} = \mathbf{Q}^\top \mathbf{A}$
- Ses éléments diagonaux correspondent aux normes des $\mathbf{v}_j$ du procédé de Gram-Schmidt

Factorisation QR (2/2)

- La décomposition fonctionne pour des matrices carrées ou rectangulaires ($n \leq m$), à condition que les colonnes de $\mathbf{A}$ soient indépendantes

- Illustration avec $m = n = 3$:

$$\begin{bmatrix} & & \\ \mathbf{u}_1 & \mathbf{u}_2 & \mathbf{u}_3 \\ & & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} & & \\ \mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \mathbf{q}_3 \\ & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1^\top \mathbf{u}_1 & \mathbf{q}_1^\top \mathbf{u}_2 & \mathbf{q}_1^\top \mathbf{u}_3 \\ & \mathbf{q}_2^\top \mathbf{u}_2 & \mathbf{q}_2^\top \mathbf{u}_3 \\ & & \mathbf{q}_3^\top \mathbf{u}_3 \end{bmatrix}$$

- Les formules des moindres carrés se simplifient en $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{Q}^\top\mathbf{b}$ où $\mathbf{R}^{-1}$ se calcule facilement par remontée triangulaire

Exercice 3

Effectuer la décomposition QR de $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ -1 & 0 & -3 \\ 0 & -2 & 3 \end{bmatrix}$